

## МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАРБОНИТРИДА УРАНА С ПЕРЕМЕННЫМИ ЗАРЯДАМИ ИОНОВ

Пицхелаури С.С.<sup>1\*</sup>, Борисенко Д.С.<sup>1</sup>, Некрасов К.А.<sup>1</sup>, Гупта С.К.<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Колледж Святого Ксавьера, г. Ахмедабад, Индия

\*E-mail: [lauri2011@mail.ru](mailto:lauri2011@mail.ru)

## MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION OF URANIUM CARBONITRIDE USING VARIABLE ION CHARGES

Pitskhelaury S.S.<sup>1\*</sup>, Borisenko D.S.<sup>1</sup>, Nekrasov K.A.<sup>1</sup>, Gupta S.K.<sup>2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> St. Xavier's College, Ahmedabad, Gujarat, India

Annotation. Molecular dynamics simulation of mixed  $U_nC_mN_k$  carbonitride crystals with independent variation of the particle charges is carried out. The empirical interaction potentials used for the simulation are obtained from the experimental characteristics of UC, UN,  $U_2C_3$ ,  $U_2N_3$ ,  $UC_2$ ,  $UN_2$  crystals, namely the parameters of the crystal lattice, the elastic moduli and the linear expansion coefficients. The relevance of varying the ion charges in the simulations is demonstrated.

Рассмотрена задача молекулярно-динамического моделирования кристаллов  $U_nC_m$ ,  $U_nN_m$ , а также смешанных карбонитридов  $U_nC_mN_k$  в приближении парных потенциалов взаимодействия с независимым варьированием зарядов частиц в процессе вычислительного эксперимента. Предложены эмпирические потенциалы взаимодействия всех пар ионов, восстановленные с использованием экспериментальных характеристик кристаллов UC, UN,  $U_2C_3$ ,  $U_2N_3$ ,  $UC_2$ ,  $UN_2$ : структуры и параметров кристаллической решётки, модулей упругости, коэффициентов линейного расширения. Полученный универсальный набор потенциалов позволил количественно воспроизвести перечисленные характеристики кристаллов при молекулярно-динамическом моделировании.

Проведено молекулярно-динамическое моделирование нанокристаллов  $U_nC_m$ ,  $U_nN_m$  и  $U_nC_mN_k$ , включавших от 2000 до 10000 частиц, в диапазоне температур от 300 К до плавления. Определены зависимости постоянных решётки, модулей упругости, теплоёмкости, температуры плавления, объёмных и поверхностных энергий модельных кристаллов от состава и размера. Показана актуальность варьирования заряда ионов при расчёте характеристик рассмотренных кристаллов. Проведено сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными.

*Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-52-48008 ИНД\_оми. С.К. Гупта также благодарит Департамент науки и технологии (Индия) и РФФИ за поддержку по гранту INT/RUS/RFBR/IDIR/P-6/2016.*